

Поташников С. И., аспирант  
Некрасов К. А., доц., канд. физ.-мат. наук  
Купряжкин А. Я., проф., д-р физ.-мат. наук

## ВЫСОКОСКОРОСТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В НАНОКРИСТАЛЛАХ ДИОКСИДА УРАНА

Для получения феноменологических характеристик кинетических процессов в вычислительных экспериментах необходимо длительное моделирование на системах с числом частиц, достаточно большим для статистического усреднения. В частности, количество диффузионных прыжков при постоянной температуре прямо пропорционально количеству наблюдаемых частиц и времени наблюдения, однако, *зависимость вычислительной нагрузки при моделировании систем с дальнедействующими силами – квадратичная от числа частиц, но линейная от времени моделирования* – поэтому в таких исследованиях выгоднее увеличивать количество шагов по времени, а не число частиц. А значит, важно добиться наименьших вычислительных затрат на один шаг времени.

Эксперименты показали, что для моделирования диффузионных процессов достаточным является размер системы порядка  $\sim 10^4$  частиц. В частности, коэффициенты диффузии в системах с различными размерами в диапазоне 6144–20736 ионов отличались в пределах нескольких процентов. Для систем такого размера, в результате экспериментального сравнения быстродействия различных методов: прямой расчет, Ewald, PME, P3M, TreeCode, FMM – выбор был сделан в пользу параллельного прямого расчета.

Объектом исследования выбран ионный нанокристалл диоксида урана, в связи с потребностью в прогнозировании свойств окисного ядерного топлива современных реакторов. Экспериментальные данные по диффузии, в связи с трудностью их получения, известны для достаточно низких температур, соответствующих кристаллическому состоянию  $\text{UO}_2$ , что не позволяет использовать их в области суперионной фазы и тем более в расплавленном состоянии. С другой стороны, известные вычислительные эксперименты по моделированию  $\text{UO}_2$  проводились на небольших системах, при малом числе шагов и существенных затратах времени, что, в частности, делало невозможным получение информации о кинетических процессах в области средних и низких температур.

Моделирование нанокристаллов  $\text{UO}_2$  с различным числом частиц (от 2592 до 20736) проводилось на специально разработанном программно-аппаратном комплексе на базе стандартной однопроцессорной рабочей станции (AMD AthlonXP 1700+, 512 DDR PC3200, Nvidia nForce2 Ultra, Nvidia GeForce6600GT), реализующем технологию *поточно-параллельных вычислений*. Это сократило время расчетов на *порядок* по сравнению со специально оптимизированными версиями программ молекулярной динамики, использующими технологии SIMD-распараллеливания (SSE, 3Dnow), и на *два порядка* по сравнению с «последовательными» реализациями. Динамика системы отображалась в реальном времени без ущерба производительности

благодаря аппаратному ускорению трехмерной графики с помощью API Microsoft DirectX 9.

Сравнение скорости расчетов на кристалле из 12000 ионов

Программно-аппаратная реализация молекулярной динамики	Время, затрачиваемое на расчет		
	1 шаг, с	100.000 шагов, ч	1.000.000 шагов, сут.
* Простейшие «последовательные» реализации	20...60	555.6...1666.7	231.5...694.4
* SIMD реализации авторов (C++, SSE, 3Dnow) и (C#, .NET)	4 и 4.8	111.1 и 133.3	46.3 и 55.6
MPI параллельная реализация авторов (16-проц. кластер)	0.8	22.2	9.7
* поточно-параллельная реализация авторов (C#, C++, asm)	0.43	11.9	4.9

- все расчеты проводились на аппаратной базе рабочей станции: AMD AthlonXP 1700+, 512 DDR PC3200, Nvidia nForce2 Ultra, Nvidia GeForce6600GT;
- кроме MPI версии, которая запускалась на кластерс из 16 процессоров Intel Xeon 2.8 Ghz.

С использованием новой технологии стало доступно моделирование систем порядка  $10^4$  частиц на временах наблюдения порядка  $10^6 \sim 10^7$  шагов в сутки. Это позволило обнаружить скачок коэффициента диффузии кислорода при суперионном переходе. «Объемная» энергия активации диффузии кислорода в кристаллической фазе –  $2.8 \pm 0.1$  эВ, а после плавления кислородной подрешетки при  $T > 2700$  К понизилась до  $1.7 \pm 0.1$  эВ; «поверхностная» –  $2.3 \pm 0.1$  эВ, и при  $T > 2200$  К понизилась до  $1.6 \pm 0.1$  эВ. Полученные результаты находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными и другими работами по молекулярно-динамическому моделированию в пределах погрешностей вычислительного эксперимента.

Поверхностные и объемные коэффициенты диффузии собственных ионов, а также энергии активации диффузии, рассчитаны в широком диапазоне температур, включающем все три фазовых состояния: кристалл, суперионное и расплав (в том числе для малоподвижного урана, процессы переноса которого методом молекулярной динамики практически не исследованы). Воспроизведены соответствующие фазовые переходы – суперионный и плавление – при температурах  $\sim 2700$  К и  $\sim 3100$  К, соответственно.